代数的多重格子法と高並列実装手法 (現象解明に向けた数値解析学の新展開 II)

AUTHOR(S):

藤井, 昭宏; 野村, 直也; 田中, 輝雄

数理解析研究所講究録
第2037巻 2017年 17-20

代数的多重格子法と高並列実装手法

藤井 昭宏 *
工学院大学
Akihiro Fujii
Kogakuin University

野村 直也
工学院大学
Naoya Nomura
Kogakuin University

田中 輝雄
工学院大学
Teruo Tanaka
Kogakuin University

1 はじめに

代数的多重格子法は $Ax=b$ を高速に解く手法である. 近年, 非対称問題への対応など, 特別な形の問題行列に特化した手法も活発に研究されている. またこの解法は領域並列性があるため, 高並列な計算環境とも相性がよく, 引き続き重要な解法となることが期待されている. 本稿では, 代数的多重格子法の導出と, その一種であるSA-AMG法 [1] のアルゴリズムを示し, ニアカーネルベクトルの設定による収束性の変化や, 効率的な並列実装について, 我々が行ってきた研究を紹介 [2, 3] する. なお実験はすべて東京大学のFX10スーパーコンピュータシステム上で行った.

2 代数的多重格子法

代数的多重格子法は $Ax=b$ という問題行列から未知数の少ない連立一次方程式 $A_cx_c=b_c$ を作り, これらを交互に解くことで効率良く解を収束させる手法である. ここでは問題行列 A は対称正定値行列とする. 未知数の少ない方程式を使う目的は, 元のままの行列では解きにくい誤差成分を補正するためである. 代数的多重格子法の中で連立一次方程式を解くときはヤコビ法やガウスザイデル法など古典的な解法が使われることが多く, まずそれらの解法の解きにくい誤差成分について考える.

古典的反復解法では, $x_{new}=x_{old}+M(b-Ax_{old})$ のように解を更新する. 但し行列 M は A^{-1} を近似したものである. リチャードソン法, ヤコビ法やガウスザイデル法はどは M はそれぞれ $sI, D^{-1}, (D+L)^{-1}$ としている. もし x_{old} に誤差成分 e が入っており, $Ae\approx 0$ ならば, 古典的反復解法は残差ベクトルから解を補正するため, 誤差成分 e を取り除くのは難しい. そのため代数的多重格子法では, この $Ae\approx 0$ でかつ $e\neq 0$ となるようなベクトル e をニアカーネル成分と呼び, 未知数の少ない連立一次方程式で補正することを目的とする.

そのため, 未知数の少ない補正解 x_c を元の未知数の多いベクトルに変換する補間演算子 P を定義し, $x=x+Px_c$ という式により解を補正する. このとき二アカーネル成分に入ってる誤差を消すためには, 行列 P の値域に二アカーネル成分が含まれる必要がある. この条件を満たす P が何らかの手法により定義できたとすると, 解は Px_c 分だけ補正されるので, 誤差も $e_{new}=e_{old}-Px_c$ となる. 行列Aは対称正定値と想定しているので, Aノルムが定義でき, $\|e_{new}\|_A$ の最小化をする x_c を考える.

$$min\|e_{new}\|_A = min\|e_{old}-Px_c\|_A$$

*fujii@cc.kogakuin.ac.jp

これは $(e_{old} - Px_c)^t A(e_{old} - Px_c)$ を最小化する x_c を求めることになり x_c で微分して 0 とすることで，$P^t APx_c = P^t(b - Ax)$ を解けば良いことが分かる．これにより，P が決まると次に示すような 2 レベル法が導出できる．

1. 古典的反復解法を $Ax = b$ に対して行う．
2. 右式により補正解を少ない未知数で計算する．$P^t APx_c = P^t(b - Ax)$
3. 補正解を元の解に足し込む．$x = x + Px_c$
4. 1 に戻る

このアルゴリズムにより，行列 P の値域に入っている誤差成分は下のレベルで取り除くことができる．行列 A の二アカーネル成分を値域にうまく包含する行列 P を生成することで，古典的反復解法の収束しにくいところを粗いレベルで補正できるようになる．行列 P の生成方法により，様々な代数的多重格子法が提案されている．

2.1 SA-AMG 法

SA-AMG 法 [1] では，明示的に二アカーネルベクトルを未知数のグループに分けて列を分割することで行列 P を作成する．下の補間行列の例では，6 個の未知数を 3 個ずつの 2 個の未知数グループに分け，二アカーネルベクトルを分割したものを作成している．$\tilde{P}_{scalar}$ では定数ベクトルを，$\tilde{P'}_{vector}$ では，二アカーネルベクトルが，定数成分と -0.5〜0.5 まで一定に増加するベクトルであった場合の例である．$(1,1)^t$ もしくは $(1,0,1,0)^t$,$(0,1,0,1)^t$ とかけあわせることによって，$\tilde{P}_{scalar}$ の場合は定数ベクトルが生成され，$\tilde{P'}_{vector}$ の場合は対応する 2 本のニアカーネルベクトルが取り出せ，P がニアカーネルベクトルを値域に持つという条件を満たせている．複数本の二アカーネルベクトルを使う場合，$\tilde{P'}_{vector}$ のように一度作成した上で，二アカーネル成分 1 本目と 2 本目で補間する成分を分離をするため，各未知数グループ内で $\tilde{P'}_{vector}$ の要素を直交化させる．それにより，$\tilde{P}_{vector}$ を得る．

$$\tilde{P}_{scalar} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{P'}_{vector} = \begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 0 & 0 \\ 1 & -0.3 & 0 & 0 \\ 1 & -0.1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0.1 \\ 0 & 0 & 1 & 0.3 \\ 0 & 0 & 1 & 0.5 \end{pmatrix}, \quad \tilde{P}_{vector} = \begin{pmatrix} 1 & -0.2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -0.2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0.2 \end{pmatrix}$$

$\tilde{P}_{scalar}$ と $\tilde{P}_{vector}$ の値域に，指定した二アカーネル成分が含まれることは明らかだが，未知数グループごとに値を取り出しているため，列ベクトル単体では二アカーネル成分からは遠くなっている場合があり得る．行列 P の値域は二アカーネルに近い部分を広く含んでいた方がいいため，行列 P の各列ベクトルも二アカーネルに近づけた方が良い．そのため，$\tilde{P}$ の各列 p_i に対して $Ap_i = 0$ に対する減速ヤコビ法を 1 回適用し，更新された列ベクトル p_i を並べて行列 P を構成する．この処理により値域にニアカーネルベクトルを含むという条件を残しながら，各列ベクトルの A ノルムを減少させることができる．このようにして補間行列 P が生成できたあとは前節の代数的多重格子法と同じ枠組みを利用する．

3 収束しにくい成分の追加

SA-AMG 法は収束しにくい成分として，二アカーネル成分を直接用いて補間行列 P を生成するため，収束しなかった成分を収束しにくい成分として追加登録することも可能である．AMG の反復解法部を繰り返

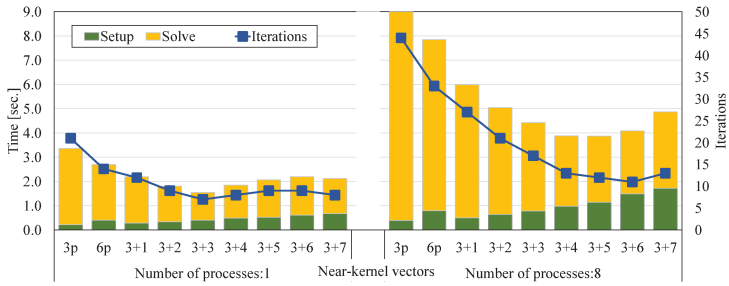

図 1: 二アカーネルベクトルの設定と収束性

し適用し収束しにくい成分を使って問題に応じた補間行列 P を作る手法については adaptive MG 法 [4] という先行研究がある．ただし，ニアカーネルベクトルの本数が並列性能にどの程度影響があるか，本数を大きく増やした時にどのような振る舞いになるか，$Ax = 0$ に AMG を繰り返し適用した後の解ベクトルをニアカーネルとして適用することでどこまで収束が改善するのか，などはよく知られておらず，我々は [2] の中でこれらを検証した．本節では，この結果を簡単に紹介する．

対象とした問題は 3 次元弾性体で，ヤング率を 5 と 0.5 と 10 倍にして，外側が柔らかく，内側は固い物体で上面の一部に力を及ぼすとどのように変形するか，二アカーネルベクトルの設定を変化させて収束性の変化を調べた [2]．図 1 に 1 プロセスあたり，$15 \times 15 \times 15$ の節点領域を割り当て，1 プロセスのときと 8 プロセスのときの収束時間，反復回数を示す．setup がマルチレベル構築部の時間であり，Solve が解法部の時間である．1 節点あたり各軸方向への変位の情報があり，3 変数となる．横軸は二アカーネルベクトルの設定で 3p, 6p はそれぞれ平行移動 3 方向と，平行移動と回転の 6 方向をニアカーネルベクトルとして用いたときの結果である．3+1 から 3+7 は平行移動 3 方向と $Ax = 0$ に対して初期解として乱数ベクトルを入れて，SA-AMG 法（V-cycle）を 20 回適用し，収束しなかった成分を新しい収束しにくい成分として追加したものである．3+7 の場合はこのプロセスを 7 回繰り返し，収束しなかった成分を動的に 7 本抽出し，合計で 10 本のベクトルが二アカーネルベクトルとして利用されてマルチレベルを生成している．

実験結果から平行移動成分と回転で 6 方向を指定してソルバを回すよりも平行移動成分と 3 本から 4 本を $Ax = 0$ から抽出した方が大幅に高速になる場合があることが分かった．またプロセス数を 8 にした時には，問題サイズも 8 倍になっているが，計算時間，反復回数が増加している．この原因の一つには，粗くなったレベルのニアカーネル成分を考慮できていないことがあると考えられる．

4 高並列実装手法

SA-AMG 法は主に行列ベクトル積と行列行列積により構成されており，並列性があるが，粗いレベルでは自由度が急激に少なくなり，並列性も小さくなる．そのため，効率的な実装手法としては，段階を追って並列度を落とすことが必要になる．規則構造の問題ではグリッドの集約をすることで性能を改善することが報告されている [5]．本研究では，小さすぎる領域は隣接するプロセス領域を結合することで，疎行列の再分散を必要としない並列度の集約する実装を行った．代数的多重格子法の各問題行列の階層でプロセス間の結合グラフを作成し，それにグラフ分割ライブラリ METIS を利用することで，領域の集約を図った．図 2 に，$300 \times 300 \times 300$ の領域で拡散係数がランダムに変化するポアソン方程式を問題として設定し，並列度集約をしなかった場合（共有アグリ）と領域集約をした場合のストロングスケーリング性能，すなわち問題

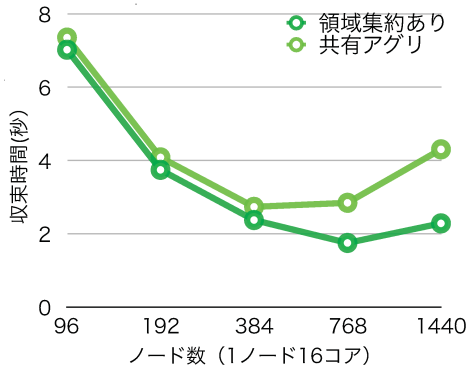

図 2: ストロングスケーリング性能

サイズ固定で並列度を増加させた時の収束時間の推移を示す．この手法により全体として性能が改善していることが分かる．

5 まとめ

本稿では SA-AMG 法の収束の原理を示し，収束性を向上させるためのニアカーネルベクトルの追加と高並列時に問題になる粗いレベルでの小さい行列への対応についての研究を紹介した．非対称行列向け手法の研究 [6] も進められており，本稿で扱ったものより複雑な問題行列に対してもより有力な解法となっていくと期待される．

謝辞 本研究の一部は JSPS 科研費 15K15998 と 15H02708 の援助を受けて実施したものです．

参 考 文 献

[1] P Vaněk, J Mandel, and M Brezina. Algebraic multigrid by smoothed aggregation for second and fourth order elliptic problems. *Computing (Vienna/New York)*, Vol. 56, No. 3, pp. 179–196, December 1996.

[2] N Nomura, A Fujii, T Tanaka, K Nakajima, and O Marques. Performance Analysis of SA-AMG Method by Setting Extracted Near-kernel Vectors. In *VECPAR 2016 proceedings. vecpar.fe.up.pt.*

[3] 代数的多重格子法ライブラリ AMGS. http://hpcl.info.kogakuin.ac.jp/lab/amgs/.

[4] M Brezina, R Falgout, S MacLachlan, and T Manteuffel. Adaptive smoothed aggregation (α SA) multigrid. *SIAM review*, 2005.

[5] K. Nakajima. Openmp/mpi hybrid parallel multigrid method on fujitsu fx10 supercomputer system. In *Cluster Computing Workshops (CLUSTER WORKSHOPS), 2012 IEEE International Conference on*, pp. 199–206, Sept 2012.

[6] T A Wiesner, R S Tuminaro, W A Wall, and M W Gee. Multigrid transfers for nonsymmetric systems based on Schur complements and Galerkin projections. *Numerical Linear Algebra with Applications*, Vol. 21, No. 3, pp. 415–438, June 2013.